

# 人工智能在中药新药质量评价中的应用与思考

母慧娟, 王一川\* (山东中医药大学附属医院, 济南 250014)

**摘要** 目的: 探究人工智能 (AI) 技术如何在中医药领域, 特别是在中药新药的质量评价中发挥关键作用, 并促进其与传统医学的融合。方法: 通过市场调研、文献查询的方法, 深入分析AI在处理不断增加的中药材种类和复杂的评价标准中的作用, 探索AI技术克服传统方法局限、促进中药质量评价体系发展的具体策略。结果: 应用AI技术于中药新药的质量评价不仅提高了疗效, 还成功降低了药物副作用和整体健康护理成本。人工智能在中医药领域的运用已经成为现代科技与传统医学结合的一个典范。结论: AI技术的运用标志着医疗领域向着更高效、更精准、更个性化的未来迈出了重要一步。AI技术的进一步发展和应用预计将推动中药研发和应用达到新的水平, 并对全人类的健康事业产生深远的影响。

**关键词:** 人工智能, 中药新药, 质量评价, 持续改进, 新药研发

中图分类号: R95; R991 文献标识码: A 文章编号: 1002-7777(2024)06-0644-009

doi:10.16153/j.1002-7777.2024.06.006

## Application and Reflection of Artificial Intelligence in Quality Evaluation of New Traditional Chinese Medicine

Mu Huijuan, Wang Yichuan\* (Shandong University of Traditional Chinese Medicine Affiliated Hospital, Jinan 250014, China)

**Abstract Objective:** To explore the key role of artificial intelligence (AI) technology in the field of traditional Chinese medicine (TCM), especially in the quality evaluation of the New Chinese Medicine and promote its integration with traditional medicine. **Methods:** Employing market research and literature query, AI's function in dealing with the increasing variety of Chinese medicinal materials and intricate standards of evaluation was deeply analyzed. In addition, the specific strategies for AI technology to overcome the limitations of traditional methodologies and promote the development of the quality assessment system for TCM were explored. **Results:** The application of AI technology in the quality evaluation of the New Chinese Medicine not only heightened therapeutic efficacy but also succeeded in reducing drug-related side effects and overall healthcare costs. Moreover, the application of artificial intelligence within the domain of TCM has become a model of the combination of modern science and technology and traditional medicine. **Conclusion:** The utilization of AI technology marks an important step towards a more efficient, accurate, and personalized future in the medical field. The further development and application of AI are expected to propel the research and development and application of TCM to a new level, with profound implications for the health endeavors of all humankind

**Keywords:** artificial intelligence, new traditional Chinese medicine, quality evaluation, continual improvement, drug discovery

基金项目: 国家自然科学基金 (编号 82204881)

作者简介: 母慧娟 Tel: (0531) 68616751; E-mail: lzcstd@126.com

通信作者: 王一川 Tel: 13455162819; E-mail: wangyichuan1726@163.com

中药新药研发的重要性不仅体现在其独特的疗效和对多种疾病的预防及治疗能力上,还在于其历经千年的传统医学实践与理论的沉淀。中药的研发和质量评价是对中医理论的现代诠释和应用,涉及植物、动物、矿物等多种资源的综合利用。尽管这些资源主要集中在国内,但不少品种的分布跨越国界,像西洋参、乳香、芦荟等广泛存在于世界各地,它们被纳入中医药体系,丰富了中药的种类和应用。随着现代化进程的推进,经济和科技的发展为中药新药的质量评价与研发带来了新的挑战和机遇。中药的复杂性、多样性和多变性给质量控制及疗效评价带来了困难,如何在保证中药传统疗效的同时,满足现代医学对安全性、有效性、稳定性和一致性的高标准,成为了一个亟待解决的问题<sup>[1]</sup>。

随着现代化进程的推进,中药新药的质量评价与研发面临着新的挑战和机遇。中药的成分复杂、产地分散、生长环境、采收期、剂型等因素导致了中药内在质量和临床疗效的差异,也给质量控制带来了困难。传统的中药鉴定方法,如感官鉴定和简单的物理化学鉴定技术,已难以满足当前中药行业发展的需要。因此,中药新药研发过程中对现代科学技术的融合至关重要,比如利用分子生物学、基因组学、蛋白质组学等现代生物技术;结合化学分析、光谱学、色谱学等先进物质分析技术;以及应用计算机技术和人工智能,如机器学习和大数据分析等,来提升中药的质量控制水平和临床效果评价<sup>[2]</sup>。

本文探讨了人工智能(Artificial Intelligence, AI)在中药新药质量评估中的关键作用和巨大潜力。面对不断增长的中药材种类和评价标准,传统方法已无法满足需求,AI的介入使得特征提取、分类、精确分析和疗效预测等过程迅速准确。然而,数据量和质量、模型泛化能力等问题仍存在挑战。同时,也需注意AI技术应用的限制因素,如数据集完整性、算法解释性、建模复杂性等。为了充分利用AI技术推进中药质量评估的现代化,需要实施数据治理、跨学科合作、统一评价标准和规范等措施,同时关注伦理和隐私问题。通过深化对传统医学知识的传承与创新,使中药在全球医药领域占据更重要的地位,更好地服务于人类健康。

## 1 AI技术概述

AI在中药领域的应用与研究有着巨大的优势

和潜力。通过模拟人类智能过程,尤其在机器学习和深度学习方面,AI已成为推动许多科学进步的关键技术。机器学习的发展始于上世纪50年代<sup>[3]</sup>,它强调如何让机器从数据中自动学习,获取新知识和技能。这种技术在自然语言处理、图像识别等领域表现出强大的动力,并逐渐扩展到了生物医学和药物发现领域<sup>[4]</sup>。

人工智能相关技术,尤其是机器学习和深度学习<sup>[5]</sup>,已经在疾病靶点预测、高通量数据分析以及系统生物学建模等多个领域发挥了显著作用。随着大量的多组数据的累积,这些技术得以利用庞大的数据集进行学习和模式识别。计算机算法能够整合这些数据,解决中医药中存在的复杂数据信息和变量的问题。在中医疾病的治疗和诊断过程中,寻找并阐明广阔化学空间中具有生物活性的药物分子是最艰巨的任务。然而,数据显示,多达90%的天然药物分子无法通过第二阶段的临床试验<sup>[6]</sup>,这一过程还依赖于大量的资金等方面的支持。

## 2 人工智能技术在中药新药质量评价中的潜在应用

结合中医药的复杂性和网络药理学的发展<sup>[7]</sup>,AI技术的应用可以优化中药的配方,预测药效和副作用,实现个性化医疗。从早期的应用于西医辅助诊断和化学药物研究,到现在逐步渗透到中医药的各个领域,AI技术正展现出其在中药新药质量评价中的巨大潜力和优势。

结合中医药多靶点的特点,AI的强大数据处理能力预示着它可能成为推动中医药发展的新方法。研究发现AI算法的应用主要涉及五大方面,包括机器学习和深度学习的多种算法,如K近邻算法(KNN)、支持向量机(SVM)、随机森林(RF)、朴素贝叶斯(NB)、人工神经网络(ANN)、卷积神经网络(CNN)、反向传播(BP)和卷积神经网络(GCN)<sup>[8]</sup>。这些算法的应用在中医药领域的深入研究中开辟了广阔的前景,并有望提高中药新药研发的效率和质量。

## 3 人工智能在中药质量评价体系中的应用与探索

### 3.1 人工智能在中药质量评价体系方法的建立

#### 3.1.1 构建全面的中药质量评价电子源数据集

通过整合来自多个来源的数据,如传统药典、科研文献、临床数据及患者报告结果等,形成

一个全面的中药电子源数据集。该数据集涵盖药材的产地、采集时间、加工方法、化学成分、药效等多维度信息。对非结构化数据进行自然语言处理 (NLP) 转换为结构化信息, 并确保数据符合统一标准, 以便后续分析。

### 3.1.2 构建自动挖掘算法模型

采用机器学习算法, 如卷积神经网络 (CNN) 用于图像识别, 循环神经网络 (RNN) 用于序列数据处理, 识别和提取有效特征。运用分类和回归模型, 如支持向量机 (SVM) 和决策树 (DT), 识别中药成分与药效、安全性之间的关联模式, 并预测质量评价结果。

### 3.1.3 构建智能比对算法

利用深度学习中的相似性学习或聚类分析技术, 比对中药样本间的相似度, 并与已知高质量样本进行对比, 评估质量等级。开发异常检测算法,

如孤立森林或神经网络自编码器, 识别数据中的异常和偏差, 确保数据集的准确性和可靠性。

### 3.1.4 集成学习与模型优化

将不同算法模型如随机森林 (RF)、梯度提升机 (GBM) 等融合, 提高预测准确性和泛化能力。运用网格搜索、贝叶斯优化等方法自动调整模型超参数, 进一步优化模型性能。

### 3.1.5 交互式数据可视化

开发交互式数据可视化工具, 将复杂数据结果转化为直观图表和图形, 便于研究人员和决策者理解和解释模型输出。

### 3.1.6 持续学习与反馈机制

构建在线学习系统, 使模型能随新数据不断更新和优化。建立反馈机制, 允许用户根据实际应用效果对模型进行评价和反馈, 实现模型的持续改进, 见表1。

表1 应用 AI 优化中药质量评价体系的临床价值与技术框架概览

| 领域      | 临床价值     | 技术手段               | 结果应用      |
|---------|----------|--------------------|-----------|
| 数据集构建   | 支持临床决策   | NLP 转换非结构化数据       | 临床研究分析    |
| 自动特征挖掘  | 药效与安全性评估 | CNN 图像识别, RNN 时序数据 | 临床路径优化    |
| 智能比对    | 质量控制     | 相似性分析, 异常检测        | 质量评估与风险管理 |
| 模型集成与优化 | 稳定性与准确性  | 集成算法, 自动调参         | 精准医疗      |
| 数据可视化   | 决策支持     | 交互式图表工具            | 快速理解与应用   |
| 持续学习    | 模型与实践同步  | 在线学习, 用户反馈         | 模型持续改进    |

## 3.2 人工智能在中药质量评价体系中的应用

目前的中药质量评价体系存在不完善之处, 传统的评价方法, 如单一标记物的定量分析、超高效液相色谱法、中药指纹图谱技术, 以及代谢组学的应用等<sup>[8]</sup>, 虽然在一定程度上有其应用价值, 但也面临着方法复杂、破坏性强、成本高昂等诸多问题。且市场上的中药掺假和伪造现象严重威胁了用药安全。因此, 建立一个全面反映中药特征的质量评价系统是目前迫切需要解决的问题。

人工智能技术的出现, 为解决中药质量控制 (QC) 中的难题提供了新的可能性。例如, Guo 等人<sup>[9]</sup>采用深度学习辅助的质量缺陷滤波器方法对植物化学成分进行研究, 比传统方法能更智能、高

精度、高效率地分类复杂物质中的多种植物源化学物质。该技术还成功应用于不同品种花椒的图像识别, 准确率高达99.35%, 展现出快速准确聚类中药中不同物种的潜力。范丹君<sup>[10]</sup>提出了一种结合控制变量法和流形算法的方法来准确辨别中药材。该研究融合了辛味中药材的气味信息, 使用局部线性嵌入算法 (LLE) 和线性判别分析 (LDA) 对白术和其他类辛味中药材进行数据降维、特征提取和分类, 取得了准确的分类结果。另外, Liu 等人<sup>[11]</sup>则是利用图像、气体和味道传感器量化药材特征, 并通过支持向量机 (SVM) 模型训练学习, 建立了药材特征数据库。这一基于多传感器信息融合的药材分类和评级系统能够提供准确的分类和评级结果。

此外, Zhao等人<sup>[12]</sup>运用机器学习方法, 包括遗传算法优化的区间偏最小二乘法、反向传播人工神经网络和粒子群优化-支持向量机, 对中药颗粒剂质量控制进行评估。这些模型在解决中医药非线性问题和质量评估方面显示出巨大潜力。在其他研究中, 如Yun等人<sup>[13]</sup>的生长年限快速评估和鉴定, 结合深度学习和二维相关光谱技术提升了计算机技术在中药材鉴定方面的应用。此外, He等人<sup>[14]</sup>构建了预测图, 快速无损地定量测定中药活性成分。

在中药新药质量评价体系中, AI技术的应用主要表现在以下几个方面:

### 3.2.1 智能化药物及药效成分筛选

通过虚拟筛选(VS)<sup>[15]</sup>, 也即利用计算机模拟靶分子与潜在药物的相互作用。结合AI技术, 我们不仅能够发现更多的活性化合物, 而且还可以实现新药开发费用的节省, 因为这种方法可以降低药物筛选的工作量、时间和经济成本。例如, Chang等人<sup>[16]</sup>在针对2009年H1N1流感病毒的流行病学调查中, 采用多个计算算法模型从中药中筛选出针对H1和N1的活性化合物, 展示了VS在疾病治疗研究中的重要作用。此外, Liu等人<sup>[17]</sup>建立的自我关注消息传递神经网络(P-SAMPNN)模型在抗骨质疏松症治疗中也展示了VS的潜能。

利用机器学习方法, 如支持向量机(SVM)和随机森林(RF), 分析历史数据中有效成分与治疗效果之间的关系, 以预测和筛选潜在的药效成分。通过结合分子对接技术和深度学习, 进一步预测中药成分与目标蛋白的结合亲和力, 从而加速活性成分的筛选过程。

利用深度神经网络(DNN)构建QSAR模型是在中药新药发现中应用深度学习的一种新领域, 其中包括了深度生成和强化学习方法在分子设计中的应用, 以及深度QSAR模型在基于结构的虚拟筛选中的应用<sup>[18]</sup>。将其应用于预测中药成分的药理作用和毒理性质方面, 有助于临床试验设计和风险评估, 为中新药的研发提供有力支持。例如, Chen等人<sup>[19]</sup>采用深度学习和随机森林方法寻找治疗阿尔茨海默病的中草药配方, 而基于深度学习的药物诱导的心脏毒性预测模型deepHERG具有出色的预测能力<sup>[20]</sup>。

### 3.2.2 研究设计与样本量计算

AI可以协助研究者通过历史数据分析来设计

临床试验方案, 包括实验组设计和对照组的匹配。同时, 利用统计学习算法对历史临床试验数据进行分析, 预测新药临床试验所需的最佳样本量, 以确保研究的统计功效。尚美霞等人<sup>[21]</sup>指出在涉及多阅片者和多病例的研究设计中, 使用AI或机器学习辅助的医疗器械或软件的确证性临床试验, 引入多阅片者可以适当降低所需的病例样本量。此外, 应用恰当的统计方法能够科学估算阅片者和病例的样本量。AI有助于研究者通过历史数据分析来设计临床试验方案, 优化实验组设计及对照组匹配, 使用统计学习算法分析历史数据来预测新药临床试验所需的最佳样本量, 确保研究具备足够的统计效力。

### 3.2.3 临床试验数据分析

在中医诊断领域, AI技术同样展现了其潜力。例如, Lin等人<sup>[22]</sup>利用神经网络分析在中医临床实践中寻找治疗结肠直肠癌的最佳中药处方策略。从DeepMedic软件和中医癌症治疗专著中提取了141,962例案例(包括261例由资深中医治疗的病例)。通过DeepMedic软件的协助, 对症状、体征与中草药处方的术语等进行了规范化处理。研究发现, 超过20%的患者存在食欲不振、疲劳、稀便和腹痛等症状。深入分析这些中医处方, 发现其治疗原则主要为益气化湿。同时, 这些处方的整体相似度达到了81.9%。并通过神经网络分析, 对这些数据进行了进一步验证。研究首次使用机器学习支持中医临床诊断和处方制定, 标志着中医治疗进入了一个个性化和科学化的新时代。

中医临床诊断受医生主观因素的影响较大, 缺乏规范性和准确性。当前, AI技术特别是深度学习例如CNN, 面向端到端处理非结构化数据, 提供了一种自动感知和理解输入数据的方式, 从而提升了中医诊断的客观性和精确度<sup>[23]</sup>。利用深度学习算法对临床试验数据进行分层分析, 提高疗效评估的准确性。同时, 运用自然语言处理技术分析患者反馈, 以增强对临床结果的理解。例如, 宫爱民等<sup>[24]</sup>对海口市肝硬化患者的临床舌面资料进行了深度分析, 获取了定量且客观的数据。这一研究推动传统中医望诊方法向客观化发展, 为中医医师在临床实践中提供了标准化操作流程, 提升了疾病信息采集的精准度。同时, 朱培超等<sup>[25]</sup>在中医理论指导下, 构建了一个人工智能数据库, 运用大数据技术使舌诊更加精确、量化和科学。该人工智能系统能够

实时反映病情变化,逐步发展成为成熟的、以中医舌诊为核心的智能诊断平台。Greasy<sup>[26]</sup>能够辅助COVID-19的诊断,而基于舌象<sup>[27]</sup>的CNN模型则能够自动构建草药处方,充分体现了物理信息在中医诊断中的价值。更进一步的,机器学习方法建立的无创糖尿病风险预测模型以及深度生成学习用于中医电子健康记录(EHR)的自动化诊断,都是AI在中医诊断中应用的典范。

### 3.2.4 药品质量在线监控

采用实时分析技术,例如过程分析技术(PAT)与人工智能(AI)模型,为药品生产过程中关键参数的监控提供了有力保障。这种集成技术确保产品在生产至临床试验阶段具有质量一致性。同时,引入图像识别技术以有效监督制药过程,自动化排除不符合标准的产品,大幅降低人为操作失误。

在传统中药材鉴定领域,Sun等人<sup>[28]</sup>运用中红外和近红外光谱技术,研发了一种新颖的数据融合方法,以区分半夏及其3种相关品种或伪品。该方法在分类结果解释上具有直观性,以100%的准确率鉴别4类样本,效果优于单一光谱技术。Sun等人<sup>[29]</sup>通过运用小波压缩和间隔偏最小二乘法筛选特征波段,结合多种分类算法,构建了一种快速、无损、准确的中层次数据融合方法,用于辨识正品大黄与伪品。孙飞等人<sup>[30]</sup>在姜半夏及其伪品光谱数据基础上,采用光谱偏最小二乘判别分析(PLS-DA)模型的潜变量进行数据融合,从而准确预测并优化样本在潜变量空间的分类效果。杨诗龙<sup>[31]</sup>展示了基于气味信息和味道信息联合电子鼻和电子舌对川贝母粉及其掺假品进行鉴别的方法,数据融合后的正判率超过了单一电子舌的数据,并与电子鼻的鉴别能力相当。

这些研究证实,通过高级数据处理和融合技术的应用,可以显著提高中药材鉴定的精确度和效率,为药品安全性和有效性提供有力保障。

### 3.2.5 不良事件监测与预警

在临床试验中,利用人工智能技术进行不良事件的监测与预警已成为提升患者安全的重要手段。通过时间序列分析和异常检测算法,可以对患者的生理指标进行实时监控,并及时预警可能发生的不良事件,提高临床试验的安全性<sup>[32]</sup>。

在药物相互作用的预测方面,一种基于多视

图的预测模型显著提升了预测的准确性,尤其是在处理未知药物时表现卓越。这一模型通过学习单一药物以及药物组合的子结构,能够更好地预测潜在的相互作用<sup>[33]</sup>。深度图神经网络自编码器等技术同样被应用于此类预测中,展现出了强大的性能。CASTER模型则是一个端到端的预测系统,它利用从药物SMILES字符串中提取的子结构信息来预测药物间的相互作用<sup>[34]</sup>。

目前,个性化医疗也逐渐成为趋势,采用自上而下的反馈系统控制技术,支持个体化的药物选择,为患者筛选最合适的治疗方案<sup>[34]</sup>。在不良反应的预测研究上,基于构效关系和决策树算法的机器学习模型已被用于预测中枢神经系统、肝脏和肾脏等药物的不良反应<sup>[35]</sup>。此外,考虑到新型冠状病毒肺炎疫情对全球健康的影响,已有研究利用XGBoost算法结合疫苗类型、人口统计数据以及不良反应信息,构建了预测新型冠状病毒肺炎疫苗不良反应严重程度的机器学习模型<sup>[36]</sup>,这对于公共健康事件的应对具有重要意义。这些技术的发展,为临床试验安全性的提升以及不良反应的管理提供了强有力的工具和方法。

### 3.2.6 成本效益分析

在成本管理方面,AI不仅推动了医学的精准化,还为经济效益分析带来了创新。它通过构建模型来模拟多种临床路径和治疗方案,预测新药的成本效益比,为临床试验和日后的医疗实践提供经济分析。这种预测不仅使临床试验设计更为经济高效,还优化了资源分配,确保了患者接受到成本效益最高的治疗方案。因此,AI在减少医疗过程中的不必要开支和提高整体治疗效果方面发挥着重要作用,对于推动医疗服务提质增效具有重要价值。例如,人工智能在整合中医学的传统诊疗方法与现代技术方面展现出巨大的潜力<sup>[37]</sup>。中医学的整体治疗观念与大数据技术收集全面信息的目标有一定的共同点。通过转化传统的中医诊断方法如望、闻、问、切中的主观体验为可采集和分析的客观数据,大数据技术正帮助中医学实现量化,并达到与西医学以及其他自然科学领域同样的数据驱动的精确性水平。

### 3.3 AI在中药质量评价体系中的成本测算

在中药的临床应用中,利用AI技术,特别是机器学习和网络分析方法,具有重大的经济潜力和

成本效益。通过对药物化学性质、生物标志物和基因表达数据的综合分析，AI技术可以提高中药组合的筛选效率，降低了传统研发流程中耗时和成本高昂的试验阶段<sup>[38]</sup>。

从成本节约的角度出发，AI技术的运用减少了大规模临床前实验的需求，这些实验通常需要昂贵的试剂和设备，以及大量的人工投入。例如，通过算法模型，可以预测药物间的相互作用，避免了物理试验所需的反复试验和错误。深度学习网络如Deep Synergy的应用进一步降低了在发现有效的药物组合中所需的试验次数。此外AI在中药研发中的应用有助于识别出更加有效的药物组合，这不仅能提升疗效，而且还能减少不必要的药物组合带来

的副作用。长远来看，这可能会减少因不良反应导致的健康护理成本。

尤其是，AI技术使得个性化医疗成为可能，能够针对个体病人的特定状况提供更为精准的治疗方案。这种精准医疗可以提高治疗效果，减少治疗的次数和药物浪费，从而节约了患者和医疗体系的总体开支。

总的来说，尽管AI技术在研究初期需要一定的资金投入，包括数据收集、系统开发和维护等，但其长期的成本节约潜力巨大。随着技术的成熟和应用普及，软件和硬件成本有望随着规模化而逐渐降低，数据的积累也将增强模型的准确性和可靠性，见表2。

表2 AI在中药研发中的应用成本

| 应用领域     | 传统方法成本   | AI技术成本              | 节省成本 |
|----------|----------|---------------------|------|
| 药物化学性质分析 | 大量实验成本   | 深度神经网络(DNN)构建QSAR模型 | 大量节省 |
| 药物组合筛选   | 大量实验成本   | 算法模型预测              | 大量节省 |
| 药物组合试验   | 大量实验成本   | 深度学习网络如Deep Synergy | 大量节省 |
| 个性化医疗    | 治疗方案制定成本 | AI技术提供精准医疗          | 大量节省 |

综合考虑以上各项因素，AI在中药临床应用领域的引入展现出将初始投资转化为长期的节约和整体经济效益的提升。通过优化中药研发与使用流程，AI不仅有助于推动传统医学向现代化迈进，同时也在经济层面亦体现出一种具有前瞻性的投资。

#### 4 讨论

随着科技的飞速发展，AI在许多领域都展现出了巨大的潜力和价值<sup>[39]</sup>。在中药领域，AI的应用也开始崭露头角，特别是在中药新药的质量评价方面。传统的中药质量评价主要依赖于人力和经验，但随着中药材种类的增多和评价标准的复杂化，这种方式已经难以满足现代需求。而AI的出现，为这一领域带来了革命性的变革。

AI在中药新药质量评价中的应用主要体现在以下几个方面：首先，AI可以通过数据挖掘和机器学习等技术，对大量的中药材样本进行快速、准确的特征提取和分类，从而对新药的质量进行初步评

估。其次，AI可以通过深度学习等技术，对中药材的微观结构和成分进行高精度分析，进一步揭示其内在的质量特征。此外，AI还可以结合传统的药理实验数据，对新药的疗效进行预测和评估，为后续的临床试验提供有力支持。然而，尽管AI在中药新药质量评价中具有显著的优势和潜力，但在实际应用中仍面临一些挑战和问题。例如，数据的质量和规模是AI应用的基础，但目前中药领域的数据还存在标准化程度不足、样本量较小等问题，见表3。此外，AI模型的泛化能力也需要进一步提高，以适应中药材种类的多样性和评价标准的复杂性。

为了更好地推进AI在中药新药质量评价中的应用，我们需要采取一系列措施。首先，加强数据治理和标准化工作，提高数据的质量和规模。其次，加强跨学科合作，推动AI技术与中药学的深度融合。此外，制定统一的标准和规范，为AI在中药新药质量评价中的应用提供指导和依据。

表 3 AI 在中药新药质量评价中的应用局限性

| 局限性     | 具体内容  |
|---------|---|
| 数据质量和数量 | AI 模型的性能高度依赖于训练数据的质量和数量。中药复杂的成分使得相关数据的获取变得困难,且中药数据常有标准化不足、数据不全等问题。                                    |
| 解释性与透明度 | AI, 尤其是深度学习模型通常被视为“黑盒”模型, 这意味着它们的决策过程缺乏透明度。在中药质量评价中, 理解决策的基础和过程至关重要。                                  |
| 复杂性建模   | 中药的复合成分和多靶点效应难以通过传统的 AI 模型来精确建模。中药成分间的相互作用和协同效应对于 AI 算法而言仍是一个巨大的挑战。                                   |
| 法规和标准   | 中药新药的评价需要遵守严格的法规要求。这些法规要求可能难以翻译成为 AI 算法能够理解和执行的指令。同时, AI 在中药领域的应用尚缺乏统一的评价标准和指南。                       |
| 跨学科融合障碍 | 中药质量评价是一个多学科交叉的领域, 需要药理学、中药学、化学、生物信息学等多个领域的知识。AI 技术的开发者可能缺乏必要的跨学科知识, 这可能导致模型开发和结果解释方面的问题。             |
| 变异性和适应性 | 中药材的质量受到许多因素影响, 如土壤、气候、收获季节等, 这些变异性在 AI 模型中难以准确捕捉和模拟。此外, 中药的加工和制备方法也会对最终产品的质量产生影响, 而 AI 模型可能难以适应这些变化。 |
| 伦理和隐私   | 在收集和处理中药相关数据时, 可能会涉及到患者隐私或知识产权的问题, 尤其是当利用 AI 进行药效关联研究时, 这些数据可能涉及敏感信息。                                 |

总的来说, AI在中药临床应用中的利用正在逐渐成熟, AI在中药新药质量评价中具有广阔的应用前景和价值。通过克服挑战、加强合作、制定标准等措施, 可以进一步推动AI在中药领域的应用和发展, 为中药产业的现代化和国际化提供有力支持。同时, 我们也需要关注到AI技术可能带来的伦理、隐私等问题, 确保其在应用过程中遵循相关法律法规和伦理原则。

#### 参考文献:

- [1] 黄芳, 杨红飞, 朱迅. 人工智能在新药发现中的应用进展[J]. 药学进展, 2021, 45 (7): 502-511.
- [2] Soon WW, Hariharan M, Snyder MP. High-throughput Sequencing for Biology and Medicine[J]. Molecular Systems Biology, 2013 (9): 640.
- [3] Li CY, Chen HY, Liu WP, et al. Multi-fingerprint Profiling Combined with Chemometric Methods for Investigating the Quality of Astragalus Polysaccharides[J]. International Journal of Biological Macromolecules, 2019, 123: 766-774.
- [4] Choi RY, Coyner AS, Kalpathy CJ, et al. Introduction to Machine Learning, Neural Networks, and Deep Learning [J]. Translational Vision Science & Technology, 2020, 9 (2): 14.
- [5] Dey D, Slomka PJ, Leeson P, et al. Artificial Intelligence in Cardiovascular Imaging: JACC State-of-the-Art Review[J]. Journal of the American College of Cardiology, 2019, 73 (11): 1317-35.
- [6] Matias M, Pinho JO, Penetra MJ, et al. The Challenging Melanoma Landscape: From Early Drug Discovery to Clinical Approval[J]. Cells, 2021, 10 (11): 3088.
- [7] 汪麟双, 杨思霞, 程卫东, 等. 中药复方治疗阿尔茨海默病的网络药理学研究进展[J]. 辽宁中医杂志, 2024, 1: 1-13.
- [8] Li D, Hu J, Zhang L, et al. Deep Learning and Machine Intelligence: New Computational Modeling Techniques for Discovery of the Combination Rules and Pharmacodynamic Characteristics of Traditional Chinese Medicine[J]. European Journal of Pharmacology, 2022, 933: 175260.
- [9] Guo J, Zhang L, Shang Y, et al. A Strategy for Intelligent Chemical Profiling-guided Precise Quantitation of Multi-components in Traditional Chinese Medicine Formulae-QiangHuoShengShi Decoction[J]. Journal of Chromatography A, 2021, 1649: 462178.
- [10] 范丹君. 基于多传感器的辛味中药材气一味信息融合研究[D]. 广州: 广东工业大学, 2014.

- [11] Zhou Y, Zuo Z, Xu F, et al. Origin Identification of Panax Notoginseng by Multi-sensor Information Fusion Strategy of Infrared Spectra Combined with Random Forest[J]. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2020, 226: 117619.
- [12] Zhao J, Tian G, Qiu Y, et al. Rapid Quantification of Active Pharmaceutical Ingredient for Sugar-free Yangwei Granules in Commercial Production Using FT-NIR Spectroscopy Based on Machine Learning Techniques[J]. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2021, 245: 118878.
- [13] Yue J, Li W, Wang Y. Superiority Verification of Deep Learning in the Identification of Medicinal Plants: Taking Paris Polyphylla var. Yunnanensis as an Example[J]. *Frontiers in Plant Science*, 2021, 12: 752863.
- [14] He J, He Y, Zhang AC. Determination and Visualization of Peimine and Peiminine Content in Fritillaria Thunbergii Bulbi Treated by Sulfur Fumigation Using Hyperspectral Imaging with Chemometrics[J]. *Molecules (Basel, Switzerland)*, 2017, 22 (9): 1402.
- [15] 刘润哲, 宋俊科, 刘艾林, 等. 人工智能在基于配体和受体结构的药物筛选中的应用进展[J]. *药学报*, 2021, 56 (8): 2136-2145.
- [16] Chang SS, Huang HJ, Chen CY. Two Birds with One Stone? Possible Dual-targeting H1N1 Inhibitors from Traditional Chinese Medicine[J]. *PLoS Computational Biology*, 2011, 7 (12): e1002315.
- [17] Liu Z, Huang D, Zheng S, et al. Deep Learning Enables Discovery of Highly Potent Anti-osteoporosis Natural Products[J]. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2021, 210: 112982.
- [18] 杜哲. 深度神经网络在QSAR建模中的应用研究[D]. 兰州: 兰州大学, 2019.
- [19] Chen JQ, Chen HY, Dai WJ, et al. Artificial Intelligence Approach to Find Lead Compounds for Treating Tumors[J]. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 2019, 10 (15): 4382-400.
- [20] Cai C, Guo P, Zhou Y, et al. Deep Learning-Based Prediction of Drug-Induced Cardiotoxicity[J]. *Journal of Chemical Information and Modeling*, 2019, 59 (3): 1073-84.
- [21] 尚美霞, 阎小妍, 李雪迎, 等. 采用多阅片者多病例设计评估AI辅助医疗产品临床试验的样本量估算和应用[J]. *中国卫生统计*, 2022, 39 (1): 14-18.
- [22] Lin YC, Huang WT, Ou SC, et al. Neural Network Analysis of Chinese Herbal Medicine Prescriptions for Patients with Colorectal Cancer[J]. *Complementary Therapies in Medicine*, 2019, 42: 279-285.
- [23] Jadoon MM, Zhang Q, Haq IU, et al. Three-Class Mammogram Classification Based on Descriptive CNN Features[J]. *BioMed Research International*, 2017 (1): 3640901.
- [24] 宫爱民, 曹玉, 董秀娟, 等. 120例肝纤维化患者舌面象特征分析[J]. *世界科学技术-中医药现代化*, 2016, 18 (10): 1646-1651.
- [25] 朱培超, 潘赐明, 阮亚君, 等. 探讨以人工智能诊断输出为目的的中医舌诊与病性证素关系模型构建[J]. *环球中医药*, 2021, 14 (6): 1033-1038.
- [26] Wang X, Wang X, Lou Y, et al. Constructing Tongue Coating Recognition Model Using Deep Transfer Learning to Assist Syndrome Diagnosis and Its Potential in Noninvasive Ethnopharmacological Evaluation[J]. *Journal of Ethnopharmacology*, 2022, 285: 114905.
- [27] Hu Y, Wen G, Liao H, et al. Automatic Construction of Chinese Herbal Prescriptions From Tongue Images Using CNNs and Auxiliary Latent Therapy Topics[J]. *IEEE Transactions on Cybernetics*, 2021, 51 (2): 708-721.
- [28] Sun F, Chen Y, Wang K-Y, et al. Identification of Genuine and Adulterated Pinellia ternata by Mid-Infrared (MIR) and Near-Infrared (NIR) Spectroscopy with Partial Least Squares - Discriminant Analysis (PLS-DA) [J]. *Analytical Letters*, 2019, 53 (6): 937-959.
- [29] Sun W, Zhang X, Zhang Z, et al. Data Fusion of Near-infrared and Mid-infrared Spectra for Identification of Rhubarb[J]. *Spectrochimica Acta Part A, Molecular and Biomolecular Spectroscopy*, 2017, 171: 72-79.
- [30] 孙飞, 陈雨, 王凯洋, 等. 基于红外光谱数据融合的姜半夏鉴别方法研究[J]. *北京中医药大学学报*, 2019, 42 (10): 862-868.
- [31] 杨诗龙. 基于智能感官分析技术的贝母及黄连饮片鉴别研究[D]. 成都: 成都中医药大学, 2015.
- [32] 丛晓飞, 李铭麟. 人工智能在老年多重用药中的应用[J]. *实用老年医学*, 2024, 38 (1): 11-14.
- [33] Li Z, Zhu S, Shao B, et al. DSN-DDI: An Accurate

- and Generalized Framework for Drug–drug Interaction Prediction by Dual–view Representation Learning[J]. *Briefings in Bioinformatics*, 2023, 24 ( 1 ) : 597.
- [34] 宗志鹏, 乔子耘, 张建军. 反馈系统控制: 优化药物组合的人工智能新方法[J]. *沈阳医学院学报*, 2019, 21 ( 4 ) : 289–292.
- [35] Hammann F, Gutmann H, Vog TN, et al. Prediction of Adverse Drug Reactions Using Decision Tree Modeling [J]. *Clinical Pharmacology and Therapeutics*, 2010, 88 ( 1 ) : 52–59.
- [36] Hatmal MM, Al-hatamleh MAI, Olaimat AN, et al. Side Effects and Perceptions Following COVID–19 Vaccination in Jordan: A Randomized, Cross–Sectional Study Implementing Machine Learning for Predicting Severity of Side Effects[J]. *Vaccines*, 2021, 9 ( 6 ) : 556.
- [37] 张德政, 哈爽, 刘欣, 等. 中医药领域人工智能的研究与发展[J]. *情报工程*, 2018, 4 ( 1 ) : 13–23.
- [38] Wang X, Wang ZY, Zheng JH, et al. TCM Network Pharmacology: A New Trend Towards Combining Computational, Experimental and Clinical Approaches[J]. *Chinese Journal of Natural Medicines*, 2021, 19 ( 1 ) : 1–11.
- [39] 尹军祥, 黄鑫, 李苏宁, 等. 我国人工智能临床应用研究发展现状及建议[J]. *世界科技研究与发展*, 2023, 45 ( 2 ) : 181–188.

( 收稿日期 2024年1月24日 编辑 肖妍 )